

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕ-
ЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ТГПУ)

«Утверждаю»
Декан биолого-химического факультета

_____ А.С. Минич

«29» _____ 08 2014 года

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

М.2.В.01.ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ХИМИИ

Трудоёмкость (в зачетных единицах) –4

Направление подготовки: 04.04.01 Химия

Магистерская программа: Физическая химия

Степень (квалификация): магистр

1. **Цель изучения дисциплины:** применение основ теоретических знаний по физической химии для оценки термодинамических параметров фазовых равновесий, химической связи, ионных равновесий и несовершенств в кристаллах веществ.

Задачи:

1. дать представление о законах химической термодинамики фазовых равновесий, химической связи, ионных равновесий и несовершенств в кристаллах веществ;
 2. показать способы расчета термодинамических характеристик фазовых равновесий, химической связи, ионных равновесий и несовершенств в кристаллах веществ.
2. **Место учебной дисциплины в структуре основной образовательной программы.**
Курс «Термодинамические расчеты в химии» относится к дисциплинам вариативной части профессионального цикла Основной образовательной программы. Он изучается на 1 курсе магистратуры, для его освоения используются знания, умения и виды деятельности, сформированные в процессе освоения дисциплин предшествующей вузовской подготовки. Курс использует фундаментальные законы физики и химии, в нем широко применяется математический аппарат. Курс непосредственно связан с дисциплинами «Использование квантово-химических методов расчета в химии» и «Химия высоких энергий».

3. **Требования к уровню освоения дисциплины.**

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование и развитие **общекультурных компетенций:**

1. способностью ориентироваться в условиях производственной деятельности и адаптироваться в новых условиях (ОК-1),
2. умением принимать нестандартные решения (ОК-2),
3. владением иностранным (прежде всего английским) языком в области профессиональной деятельности и межличностного общения (ОК-3),
4. пониманием философских концепций естествознания, роли естественных наук (химии в том числе) в выработке научного мировоззрения (ОК-4),
5. владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований (ОК-5),
6. пониманием принципов работы и умением работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований (ОК-6).

профессиональных компетенций:

в научно-исследовательской деятельности:

1. наличием представления о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в экстремальных условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и другие) (ПК -1),

2. знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК -2),
3. владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (в соответствии с темой магистерской диссертации) (ПК -3),
4. умением анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным руководителем теме и самостоятельно составлять план исследования (ПК -4),
5. способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения (ПК -5),
6. наличием опыта профессионального участия в научных дискуссиях (ПК -6),
7. умением представлять полученные результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК -7),

в научно-педагогической деятельности:

8. пониманием принципов построения преподавания химии в образовательных учреждениях высшего профессионального образования (ПК -8),
9. владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных учреждениях высшего профессионального образования (ПК -9).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать:

- основные принципы и законы химической термодинамики фазовых равновесий, химической связи, ионных равновесий и несовершенств в кристаллах веществ;

уметь:

- рассчитывать температурную зависимость теплоемкости по экспериментальным данным;
- проводить расчет абсолютного значения энтропии;
- определять температурную зависимость давления паров веществ, константу равновесия, изменение энергии Гиббса, энтальпию и энтропию фазовых переходов;
- рассчитывать изменение энергии Гиббса, энергию и энтропию химической связи; оценивать влияние на эти характеристики гибридизации связи;
- определять энтальпию и энтропию образования гидратированных ионов и дефектов несовершенств в кристаллах;

владеть:

- численными методами расчета термодинамических характеристик.

4. Общая трудоемкость дисциплины 4 зачетных единицы и виды учебной работы.

Вид учебной работы	Трудоемкость (в соответствии с учебным планом) (час)	Распределение по семестрам (в соответствии с учебным планом) (час)
	Всего: 144 часов	Семестр 4
Аудиторные занятия	72	72
Лекции	36	36
Практические занятия	36	36
Семинары		
Лабораторные работы		
Другие виды аудиторных работ: занятия в интерактивной форме	18	18
Другие виды работ: экзамен	27	27
Самостоятельная работа	45	45
Курсовой проект (работа)		
Реферат		
Расчётно-графические работы		
Формы текущего контроля		Коллоквиумы, индивидуальные задания, тестирование-
Формы промежуточной аттестации в соответствии с учебным планом		экзамен

5. Содержание учебной дисциплины.

5.1. Разделы учебной дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (темы)	Аудиторные часы					Самостоятельная работа (час)
		всего	Лекции	практические (семинары)	лабораторные	В т.ч. интерактивные формы обучения	
1	Использование численных методов в термодинамических расчетах	12	6	6		3	8
2	Определение термодинамических величин	10	5	5		2	7
3	Термодинамика химической связи	32	16	16		8	17
4	Термодинамика ионных равновесий	12	6	6		3	8
5	Термодинамика несовершенств в кристаллах простых веществ	6	3	3		2	5
	Итого:	72/2	36	36		18/25 %	45

5.2. Содержание разделов дисциплины:

5.2.1. *Использование численных методов в термодинамических расчетах.* Метод наименьших квадратов (МНК). Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT$ по экспериментальным данным. Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT + cT^2$ и $C_p = a + bT + cT^2$ по экспериментальным данным. Метод графического интегрирования. Расчет абсолютного значения энтропии графическим интегрированием по методу трапеций функций вида $\int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$ и

$$\int_{T_1}^{T_2} C_p d \ln T.$$

5.2.2. *Определение термодинамических величин.* Расчет термодинамических характеристик процессов плавления, испарения и возгонки по давлению пара над твердой и жидкой фазами. Определение температурной зависимости давления пара воды над твердой фазой. Расчет энтальпии и энтропии сублимации льда. Определение температурной зависимости давления пара воды над жидкой фазой. Расчет энтальпии и энтропии испарения. Определение температуры плавления льда. Расчет температуры кипения воды.

5.2.3. *Термодинамика химической связи.* Расчет энергии и энтропии связи двухатомных молекул по температурной зависимости изменения энергии Гиббса в процессе диссоциации молекул на атомы. Расчет энергии и энтропии связи в ряду галогенов. Анализ взаимосвязи энергии и энтропии связи с физико-химическими свойствами галогенов. Применение закона Гесса для расчета энергии диссоциации газообразных молекул, содержащих более одной связи. Определение средней энергии связи. Определение энергии диссоциации метана и этана. Расчет энергии связей С-Н и С-С. Определение энергии диссоциации этилена и ацетилена. Расчет энергии кратных связей С-С. Изменение гибридизации и энергии связи в метане по мере его диссоциации. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса по давлению пара одноатомных молекул углерода над графитом. Расчет энтальпии сублимации графита и алмаза. Определение энергии связи в алмазе, графите и бензоле. Зависимость электропроводности и прочности связи от гибридизации связи в этих веществах. Вычисление энтальпий реакций по энергиям связи. Зависимость энтропии связи от симметрии молекул. Определение порядков осей и чисел симметрии молекул. Зависимость энтропии связи от числа симметрии. Вычисление энтропии связи с поправкой на симметрию. Вычисление стандартных энтропий веществ по энтропиям связи и энтропиям атомов.

5.2.4. *Термодинамика ионных равновесий.* Определение изменения энтальпии в реакции нейтрализации по теплотам растворения (с применением закона Гесса). Определение константы диссоциации воды методом ЭДС и вычисление изменения энергии Гиббса и энтальпии нейтрализации. Расчет энтальпии образования ионов H^+ и OH^- . Расчет термодинамических характеристик ионов HCO_3^- , CO_3^{2-} и Ca^{2+} . Использование энтальпий образования ионов для термодинамических расчетов.

5.2.5. *Термодинамика несовершенств в кристаллах простых веществ.* Образование дефектов по Френкелю и Шоттки. Расчет константы равновесия процесса образования вакансий по измерениям длины образца и рентгенографическому определению изменения постоянной решетки. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса при образовании вакансий и расчет теплоты дефектообразования.

5.3. Практические работы:

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование практических работ
1	5.2.1	1. Метод наименьших квадратов (МНК). Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT$ по экспериментальным данным.

		<p>2. Определение МНК параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT + cT^2$ и $C_p = a + bT + cT^2$ по экспериментальным данным.</p> <p>3. Метод графического интегрирования. Расчет абсолютного значения энтропии графическим интегрированием по методу трапеций функций вида $\int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$ и $\int_{T_1}^{T_2} C_p d \ln T$.</p>
2	5.2.2	<p>4. Определение температурной зависимости давления пара воды над твердой фазой. Расчет энтальпии и энтропии сублимации льда.</p> <p>5. Определение температурной зависимости давления пара воды над жидкой фазой. Расчет энтальпии и энтропии испарения.</p> <p>6. Определение температуры плавления льда. Расчет температуры кипения воды.</p>
3	5.2.3	<p>7. Расчет энергии и энтропии связи по температурной зависимости изменения энергии Гиббса в процессе диссоциации молекул на атомы в ряду галогенов.</p> <p>8. Применение закона Гесса для расчета энергии диссоциации газообразных молекул, содержащих более одной связи. Определение средней энергии связи.</p> <p>9. Определение энергии диссоциации метана и этана. Расчет энергии связей С-Н и С-С.</p> <p>10. Определение энергии диссоциации этилена и ацетилена. Расчет энергии кратных связей С-С. Изменение гибридизации и энергии связи в метане по мере его диссоциации.</p> <p>11. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса по давлению пара одноатомных молекул углерода над графитом. Расчет энтальпии сублимации графита и алмаза.</p> <p>12. Определение энергии связи в алмазе, графите и бензоле. Зависимость электропроводности и прочности связи от гибридизации связи в этих веществах.</p> <p>13. Вычисление энтальпий реакций по энергиям связи.</p> <p>14. Вычисление энтропии связи с поправкой на симметрию.</p> <p>15. Вычисление стандартных энтропий веществ по энтропиям связи и энтропиям атомов.</p>
4	5.2.4	<p>16. Расчет энтальпии образования ионов H^+ и OH^-.</p> <p>17. Расчет термодинамических характеристик ионов HCO_3^-, CO_3^{2-} и Ca^{2+}.</p> <p>18. Использование энтальпий образования ионов для термодинамических расчетов.</p>
5	5.2.5	<p>19. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса при образовании вакансий и расчет теплоты дефектообразования.</p>

6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины.

6.1. Основная литература по дисциплине:

1. Ягодский, В. Д. Статистическая термодинамика в физической химии : учебное пособие для вузов / В. Д. Ягодский. - 2-е изд., испр. и доп. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. - 495 с.

6.2. Дополнительная литература:

1. Карякин, Н. В. Основы химической термодинамики: Учебное пособие для вузов /

- Н. В. Карякин.- Нижний Новгород: Издательство Нижегородского государственного университета, 2003.- 462 с.
2. Основы физической химии: Теория и задачи : учебное пособие для вузов / В. В. Еремин, С. И. Каргов, И. А. Успенская [и др.].- М.: Экзамен, 2005.- 478 с.
 3. Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. В 3- ч. Ч.1. Равновесная термодинамика./ П. Эткинс, Дж. де Паула.- М: Мир, 2007.- 494 с.

6.3. Средства обеспечения освоения дисциплины:

- <http://top.msu.ru> - каталог научно-образовательных программ МГУ. Программы курсов по химии. Лекции по химии,
- <http://www.chem.msu.su/> - портал химического образования России. Российский химический журнал,
- <http://www.chem.km.ru/> - мир химии,
- <http://rushim.ru/books/books.htm> - электронная библиотека по химии,
- <http://www.chemport.ru> - химический портал ChemPort.ru. Литература по химии. Видеоопыты,
- <http://www.himikatus.ru/> - книги по химии, программы и химические видеоопыты на Himikatus.ru,
- <http://www.rushim.ru> – электронные учебники,
- <http://www.ximicat.com> – книги по химии, видеоматериалы,
- <http://td.chem.msu.ru>-интернет-страница научно-исследовательской лаборатории химической термодинамики химического факультета МГУ
- <http://www.ximuk.ru>-сайт о химии
- <http://dic.academic.ru>-Коллекция словарей и энциклопедий
- <http://www.chem.msu.su>-Портал фундаментального химического образования России
- **Архив журнала Science**, The American Association for the Advancement of Science (AAAS) - Американская ассоциация по развитию науки - некоммерческая организация, сообщество ученых, созданное в целях поддержки науки, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 01.01.2012 – бессрочно. <http://www.sciencemag.org/content/by/year#classic>
- **Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU**. При поддержке РФФИ. Лицензионное соглашение №916 от 12.01.2004 г. на период с12.01.2004 – бессрочно. <http://elibrary.ru>
- **Архив научных журналов 2011 Cambridge Journals Digital**. Издательство Cambridge University Press, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 30.03.12 – бессрочно. <http://journals.cambridge.org/action/stream?pageId=3216&level=2>
- **Архивы 169 журналов издательства Oxford University Press**. Издательство Oxford University Press, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 14.03.12 - бессрочно. <http://www.oxfordjournals.org/>
- **Цифровой архив электронных журналов издательства Taylor&Francis**. Издательство Taylor&Francis Group, НП «НЭИКОН». Договор №316-РН-211 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.2013 – бессрочно. <http://arch.neicon.ru/xmlui/>
- **УИС Россия (Университетская информационная система РОССИЯ)**. Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова (Научно-исследовательский вычислительный центр, Экономический факультет), Автономная некоммерческая организация Центр информационных исследований (АНО ЦИИ). Письмо-заявка № 21/300 от 01.03.2010 г. на период с 01.03.2010 – бессрочно.<http://uisrussia.msu.ru/is4/main.jsp>
- **БД «Марс» - сводная база данных аналитической росписи статей из периодических издания (архив 2001-2006)**. Ассоциация региональных библиотечных консорциумов (АР-

БИКОН). Договор № С/161-1/3 от 12.10.2009 г. на период с 12.10.2009 – бессрочно. http://arbicon.ru/services/mars_analitic.html

- **Архив журнала Nature.** Научное издательство Nature Publishing Group, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 27.09.12 - бессрочно. Сумма договора: оплата оказанных услуг производится из средств Минобрнауки. <http://www.nature.com/nature/index.html>
- **Архив 16 научных журналов издательства Wiley.** Издательство Wiley, издательство Taylor&Francis Group, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 317.55.11.4002 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.13 – бессрочно. <http://onlinelibrary.wiley.com/>
- **Архив научных журналов SAGE Journals Online.** Издательство SAGE Publications, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 05.02.2012 – бессрочно. <http://online.sagepub.com/>
- **Архив научных журналов издательства IOP Publishing.** Издательство IOP Publishing Института физики Великобритании, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 13.04.2012 – бессрочно. <http://iopscience.iop.org/>
- **Архив электронных журналов Electronic Back Volume Sciences Collection издательства Annual Reviews.** Издательство Annual Reviews, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.2013 – бессрочно. <http://www.annualreviews.org/>
- **Электронная библиотека ТГПУ.** <http://libserv.tspu.edu.ru/>

6.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

специализированная аудитория; компьютерный класс, имеющий выход на интернет.

№ п/п	Наименование раздела (темы) учебной дисциплины	Наименование материалов обучения, пакетов программного обеспечения	Наименование технических и аудиовизуальных средств, используемых с целью демонстрации материалов
1	Использование численных методов в термодинамических расчетах	Мультимедийные материалы.	Компьютер, проектор
2	Определение термодинамических величин	Мультимедийные материалы.	Компьютер, проектор
3	Термодинамика химической связи	Мультимедийные материалы.	Компьютер, проектор
4	Термодинамика ионных равновесий	Мультимедийные материалы	Компьютер, проектор
5	Термодинамика несовершенств в кристаллах простых веществ	Мультимедийные материалы	Компьютер, проектор

7. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины:

7.1. Методические рекомендации преподавателю:

Магистранты изучают курс в первом семестре. Теоретические знания, полученные из курса лекций, закрепляются на практических занятиях. Промежуточные срезы знаний проводятся после изучения раздела дисциплины. Промежуточный срез знаний проводится посредством устной сдачи коллоквиумов, вопросы к которым сообщаются заранее, и выполнению письменных индивидуальных заданий, разработанных по всем темам курса. Изучение курса заканчивается итоговым экзаменом.

7.2. Методические указания для магистрантов:

Курс изучается в течение 1 семестра. Перед началом семестра магистрант должен ознакомиться с разделами изучаемой дисциплины и их содержанием, получить перечень вопросов, выносимых на самостоятельную работу и на экзамен. Магистрант должен быть знаком с требованиями к уровню освоения дисциплины, формами текущего, промежуточного и итогового контроля. После изучения каждого раздела дисциплины магистрант должен пройти тестирование, сдать коллоквиум и индивидуальные задания.

4. Формы текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся.

8.1. Тематика рефератов (докладов, эссе):

1. Вычисление термодинамических функций индивидуальных веществ.
2. Методы расчета абсолютного значения энтропии.
3. Расчет энергии и энтропии кратных связей.
4. Взаимозависимость гибридизации и энергии связи в алмазе, графите и бензоле.
5. Зависимость физических свойств от гибридизации связи в веществах.
6. Зависимость энтропии связи от симметрии молекул.
7. Вычисление энтропии связи с поправкой на симметрию.
8. Расчет термодинамических характеристик ионов.
9. Использование энтальпий образования ионов для термодинамических расчетов.
10. Расчет константы равновесия и энтальпии дефектообразования вакансий в кристаллах.
11. Статистический расчет энтропии.
12. Расчет энтропии по калориметрическим данным.

8.2. Вопросы и задания для самостоятельной работы, в том числе групповой самостоятельной работы обучающихся:

При организации самостоятельной работы студентам предлагается изучить с использованием имеющейся литературы и конспекта лекций следующие разделы курса:

1. Использование численных методов в термодинамических расчетах.
2. Определение термодинамических величин
3. Термодинамика химической связи.
4. Термодинамика ионных равновесий.
5. Термодинамика несовершенств в кристаллах простых веществ

8.3. Вопросы для самопроверки, диалогов, обсуждений, дискуссий, экспертиз:

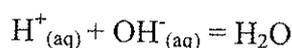
1. Современные экспериментальные и расчетные методы определения термодинамических характеристик, их развитие и совершенствование.
2. Экспериментальное определение стандартных термодинамических характеристик индивидуальных химических соединений.
3. Современные методы расчета термодинамических параметров молекул.
4. Экспериментальные и теоретические методы определения термодинамических характеристик физико-химических процессов.
5. Расчет термодинамических характеристик процессов плавления, испарения и возгонки.
6. Математические проблемы химической термодинамики.

8.4. Примеры тестов:

1. Энтальпия реакции разложения молекулы HBr на атомы составляет $+36,2$ кДж/моль. Энергия связи в молекуле HBr (кДж/моль):

- 1) +36,2 2) -72,4 3) -18,1 4) +72,4 5) +18,1 6) 36,2

2. Энтальпия реакции



равна -229,17 кДж/моль. Энтальпия образования иона $\text{OH}^-_{(\text{aq})}$ (кДж/моль):

- 1) +229,17 2) -114,585 3) 0 4) +114,585 5) -229,17

8.5. Перечень вопросов для промежуточной аттестации (к экзамену):

1. Метод наименьших квадратов (МНК).
2. Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT$ по экспериментальным данным.
3. Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT + cT^2$ и $C_p = a + bT + cT^2$ по экспериментальным данным.
4. Метод графического интегрирования.
5. Расчет абсолютного значения энтропии графическим интегрированием по методу трапеций функций вида $\int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$ и $\int_{T_1}^{T_2} C_p d \ln T$.
6. Расчет термодинамических характеристик процессов плавления, испарения и возгонки по давлению пара над твердой и жидкой фазами.
7. Определение температурной зависимости давления пара воды над твердой фазой. Расчет энтальпии и энтропии сублимации льда.
8. Определение температурной зависимости давления пара воды над жидкой фазой. Расчет энтальпии и энтропии испарения.
9. Определение температуры плавления льда. Расчет температуры кипения воды.
10. Расчет энергии и энтропии связи двухатомных молекул по температурной зависимости изменения энергии Гиббса в процессе диссоциации молекул на атомы.
11. Расчет энергии и энтропии связи в ряду галогенов. Анализ взаимосвязи энергии и энтропии связи с физико-химическими свойствами галогенов.
12. Применение закона Гесса для расчета энергии диссоциации газообразных молекул, содержащих более одной связи. Определение средней энергии связи.
13. Определение энергии диссоциации метана и этана. Расчет энергии связей C-H и C-C.
14. Определение энергии диссоциации этилена и ацетилена. Расчет энергии кратных связей C-C.
15. Изменение гибридизации и энергии связи в метане по мере его диссоциации.
16. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса по давлению пара одноатомных молекул углерода над графитом. Расчет энтальпии сублимации графита и алмаза.
17. Определение энергии связи в алмазе, графите и бензоле. Зависимость электропроводности и прочности связи от гибридизации связи в этих веществах.
18. Вычисление энтальпий реакций по энергиям связи.
19. Зависимость энтропии связи от симметрии молекул.
20. Определение порядков осей и чисел симметрии молекул. Зависимость энтропии связи от числа симметрии.
21. Вычисление энтропии связи с поправкой на симметрию.
22. Вычисление стандартных энтропий веществ по энтропиям связи и энтропиям атомов.
23. Определение изменения энтальпии в реакции нейтрализации по теплотам растворения (с применением закона Гесса).

24. Определение константы диссоциации воды методом ЭДС и вычисление изменения энергии Гиббса и энтальпии нейтрализации.
25. Расчет энтальпии образования ионов H^+ и OH^- .
26. Расчет термодинамических характеристик ионов HCO_3^- , CO_3^{2-} и Ca^{2+} .
27. Использование энтальпий образования ионов для термодинамических расчетов.
28. Образование дефектов по Френкелю и Шоттки. Расчет константы равновесия процесса образования вакансий по измерениям длины образца и рентгенографического определения изменения постоянной решетки.
29. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса при образовании вакансий и расчет теплоты дефектообразования.

8.6. Темы для написания курсовой работы (представляются на выбор обучающегося, если предусмотрено рабочим планом) Рабочим планом не предусмотрено.

8.7. Формы контроля самостоятельной работы: Формами контроля самостоятельной работы студентов являются коллоквиумы, тестирование, индивидуальные задания, подготовка и выступление с докладами.

Рабочая программа учебной дисциплины составлена в соответствии с учебным планом, федеральным государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по направлению подготовки:

04.04.01 Химия. Магистерская программа: Физическая химия
(указывается код и наименование направления подготовки)

Рабочая программа учебной дисциплины составлена:
к.т.н, доцент кафедры химии и методики обучения химии  Иваницкий А.Е.

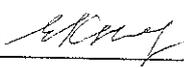
Рабочая программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры химии и методики обучения химии.

Протокол № 1 от 29.08 2019 года.

Зав. кафедрой  Полещук О.Х.
(подпись)

Рабочая программа учебной дисциплины одобрена методической комиссией Биолого-химического факультета:

протокол № 1 от 29.08 2019 года.

Председатель методической комиссии БХФ  Князева Е.П.